

اللَّهُمَّ صَلِّ وَسَلِّمْ وَبَارِكْ عَلَى سَيِّدِنَا مُحَمَّدٍ



دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک

عنوان:

**محاسبه خواص اسپینترونیکی سیستم
الکتروود فرومغناطیس - مولکول پلی اسن - الکتروود فرومغناطیس
(FM / Polyacene / FM)**

ارائه شده جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد
رشته فیزیک گرایش حالت جامد

نگارش:

مصطفی عسکری فرسنگی

اساتید راهنما:

دکتر ناصر شاه طهماسبی - دکتر سید احمد کتابی

استاد مشاور:

دکتر محمود رضایی رکن آبادی

شهریور ۱۳۸۸

تقدیم به

مولایمان، امام عصر (عج)

تشکر و قدردانی

اکنون که به یاری خداوند این تحقیق به پایان رسیده، بر خود می‌دانم از اساتید راهنمای بزرگوام آقایان دکتر ناصر شاه طهماسبی و دکتر سید احمد کتابی به پاس زحمات بی‌شائبه‌شان در طی انجام این تحقیق و استاد مشاورم آقای دکتر محمود رضایی رکن آبادی، سپاسگزاری نمایم. همچنین از اساتید گرانمایه آقایان دکتر کمپانی و دکتر بهدانی که زحمت داوری این پایان‌نامه را بر عهده داشتند نهایت تشکر را دارم.

از دوستان خوبم آقایان داود واحدی و مجتبی اشهدی که در انجام این کار مرا یاری کردند، کمال تشکر را دارم و اگر مساعدت و همکاری آنها نبود شاید این کار به سرانجام نمی‌رسید. همچنین از سایر عزیزانی که مرا در مراحل مختلف پایان‌نامه و پژوهش‌های همراه آن، به صورت مستقیم و غیرمستقیم یاری رساندند، سپاسگزاری می‌کنم:

آقایان صفارزاده، جوان، میلانی، شاکر نژاد، مجیدیان، خرمی و کریم پور.

خانمها قانع، پیله‌وری، مظفری، عسکری، کوچک‌زاده و گلرخ.

برای همه این دوستان از پیشگاه پروردگار، سلامت و سعادت آرزومندم.

در نهایت فداکاری‌های همسر و حمایت‌های خانواده‌ام را هرگز فراموش نخواهم کرد، و برای ایشان توفیقات بیشتر را از خداوند متعال خواستارم.

چکیده :

در این پژوهش، ویژگی‌های اصلی رسانندگی اسپینی سامانه الکترو-مولکول-الکترو بصورت نظری بررسی می‌شود. در این سامانه مولکولی از یک فلز فرومغناطیس (FM) نوعی بصورت شبکه مکعبی ساده به عنوان الکترو فرومغناطیس با سطح مقطع محدود و از مولکول پلی‌اسن (polyacene) به عنوان پل مولکولی بین دو الکترو استفاده می‌شود.

برای مطالعه رفتار الکترونی ساختار FM / Polyacene / FM یک مدل هامیلتونی بستگی قوی ارائه نموده و براساس آن از یک روش تابع گرین غیر تعادلی برای محاسبه خواص رسانندگی وابسته به اسپین سامانه استفاده می‌کنیم. در چارچوب مدل محاسباتی پیشنهادی و کاربرد فرمول‌بندی لانداور، مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR) سامانه محاسبه و مشخصه جریان-ولتاژ آن تعیین می‌گردد. همچنین رسانندگی وابسته به اسپین این ساختار از میان ترازهای انرژی مولکول محاسبه می‌شود که نتایج بدست آمده نشان می‌دهد این رسانندگی حساسیت قابل ملاحظه‌ای به قدرت پیوندگاه فلز/مولکول و طول مولکول دارد. علاوه بر این، محاسبات ما نشان می‌دهد که اعمال ولتاژ گیت بر مولکول باعث می‌شود تا رفتار TMR و مشخصه جریان-ولتاژ سامانه بطور قابل ملاحظه‌ای تغییر نماید. نتایج این پژوهش می‌تواند در طراحی قطعات الکترونیکی نانومتری وابسته به جریان اسپین مانند دیودها و ترانزیستورهای اسپینی، دریچه‌های اسپینی، حافظه رایانه‌ها، حسگرهای اسپینی و ... مورد استفاده قرار گیرد.

کلید واژه: پلی‌اسن، جریان اسپینی، مقاومت مغناطیسی تونلی، تابع گرین، فرمول‌بندی لانداور.

فهرست

پیش گفتار ۱

فصل اول پلیمرهای رسانا و ساختار پلی‌اسن

۱-۱ مقدمه ۶

۱-۲ پلیمر چیست ۷

۱-۳ چگونه پلیمر الکتریسیته را عبور می‌دهد ۷

۱-۴ ناپایداری پایرلز و پدیده دوپاری ۱۰

۱-۵ پلی‌استیلن ساده‌ترین پلیمر رسانا ۱۲

۱-۶ مدل بستگی قوی با برهم‌کنش الکترون-فونون در یک بعد ۱۷

۱-۷ هامیلتونی بستگی قوی برای بیشتر از یک بعد ۲۱

۱-۸ ساختار الکترونیکی پلی‌اسن ۲۳

مراجع ۳۱

فصل دوم اسپیترونیک مولکولی

۱-۲ مقدمه ۳۳

۲-۲ مفاهیم ۳۴

۳-۲ الکترونیک اسپینی ۳۹

۳۹ ۱-۳-۲ فلزات واسطه
۴۲ ۲-۳-۲ دریچه‌های اسپینی
۴۴ ۳-۳-۲ قطبش اسپینی در یک قطعه
۴۶ ۴-۳-۲ مقاومت مغناطیسی تونلی
۴۸ ۴-۲ الکترونیک مولکولی
۴۸ ترابرد از میان مولکولها
۵۱ ۵-۲ چرا اسپین و مولکولها
۵۴ ۶-۲ محاسبات نظری ترابرد
۵۴ مدل ساده
۵۵ ۷-۲ کاربردهای اسپیترونیک
۵۶ ۱-۷-۲ دریچه‌های اسپینی مولکولی
۵۷ ۲-۷-۲ قطعات فلزی و قطعات تونلی
۵۹ ۳-۷-۲ دیودها و ترانزیستورهای اسپینی
۶۶ مراجع

فصل سوم تابع گرین در تقریب بستگی قوی

۶۹ مقدمه ۱-۳
۷۰ توابع گرین و برخی کاربردها ۲-۳
۷۲ کاربردهای ساده توابع گرین ۳-۳
۷۷ تابع گرین در تقریب بستگی قوی ۴-۳
۷۷ ۱-۴-۳ تابع گرین یک بعدی
۷۹ ۲-۴-۳ شبکه مربعی
۸۲ ۳-۴-۳ شبکه مکعبی ساده
۸۵ مراجع

فصل چهارم مدل سازی و فرمول بندی

۸۶ مقدمه ۱-۴
۸۸ مدل سازی و فرمول بندی ۲-۴
۱۰۰ مراجع

فصل پنجم محاسبات و نتایج

۱-۵	مقدمه	۱۰۲
۲-۵	چگالی حالت‌های الکترونی و احتمال عبور	۱۰۳
۳-۵	جریان تونلی و مقاومت مغناطیسی تونلی	۱۱۳
۴-۵	اثر ولتاژ گیت	۱۲۵
۵-۵	قدرت پیوند بین الکترودها و مولکول	۱۲۸
۶-۵	مقایسه با مولکول‌های مشابه و نتیجه‌گیری	۱۲۹
	مراجع	۱۳۱

پیش‌گفتار

اشتیاق جهانی برای فناوری نانو پیش از قرن ۲۱ آغاز شده و یافته‌های آن از ۱۹۹۷ تا ۲۰۰۹ رشد چشمگیری داشته است. فناوری فوق ریز در دو دهه‌ی اخیر، پیشرفت‌هایی را در فناوری وسایل و مواد با ابعاد بسیار کوچک ایجاد کرده است و بسوی تحولی شگرف، که تمدن بشری را تا پایان قرن دگرگون خواهد کرد، پیش می‌برد. فناوری و مهندسی در قرن ۲۱ با وسایل، اندازگیری‌ها و تولیداتی سروکار خواهد داشت که ابعاد فوق ریزی دارند. در حال حاضر فرآیندهایی در ابعاد مولکولی قابل طراحی و کنترل است. همچنین خواص مکانیکی، مغناطیسی، شیمیایی، الکتریکی، نوری، ... مواد در لایه‌های با ضخامت حدود نانومتر قابل درک، تحلیل و سنجش است. فناوری نانو در قرن حاضر مسیری را طی می‌کند که در آن مواد فوق ریز را باید ترکیب کرد تا دانه‌های بزرگتر کار آمد بوجود آید، درست همان روشی که در طبیعت برای تکثیر و بازسازی مواد طبیعی حاکم است. مواد طبیعی، ترکیبی از دانه‌های فوق ریز با خواص مشابه و یا متفاوت با اندازه‌های در حدود نانو هستند. اثر تحقیقات در فناوری فوق ریز - هم‌اکنون در درمان بیماری‌ها و یا دست یافتن به مواد جدید به ظهور رسیده است. اکنون ساخت کامپیوترهای بسیار کوچکتر و میلیون‌ها بار سریعتر در دستور کار شرکت‌های تحقیقاتی و صنعتی قرار دارد.

در ۳۰ سال گذشته، کوچک سازی قطعات الکترونیکی باعث تحول چشمگیری در صنعت الکترونیک شده است. در حال حاضر چگونگی کاربرد مواد جدید یکی از مهمترین موضوعات تحقیقاتی روز در این صنعت است، و نیز صنعت الکترونیک نیاز به کاهش روز افزون اندازه قطعات دارد. به صورت کلی مواد را در فناوری نانو می‌توان از نظر ابعاد به سه گروه کلی تقسیم کرد: قطعات صفر بعدی، یک بعدی و دو بعدی. که در این میان قطعات یک بعدی نقش کلیدی در پیشبرد صنایع الکترونیکی داشته‌اند. چون

کوچک شدن اندازه قطعه معادل افزایش سرعت پاسخ‌دهی آن است، پژوهشگران کوشش کرده‌اند که کوچکترین ساختمان مادی قابل تصور را برای کاربردهای الکترونیکی بیابند. امروزه این گزینه، مولکولها هستند. امروزه پیش‌بینی‌های مبتنی بر نتایج تجربی نشان می‌دهند که فناوری نیم‌رسانای متکی بر استفاده از سیلیکان محدود خواهد شد [۱]. در نتیجه برای داشتن کامپیوترهای سریعتر باید چیز دیگری جایگزین فناوری سیلیکان نماییم. جایگزینی فلزات و نیم‌رساناها با رشته‌ها و قطعات پلیمری و نیز ساخت قطعات مولکولی موضوع روز نانو الکترونیک است. در حال حاضر فرایندهای الکترونیکی بسیاری در ابعاد مولکولی قابل طراحی و کنترل است. پژوهش‌هایی مبتنی بر طراحی قطعاتی بصورت ساختار فلز-پلیمر-فلز انجام می‌شود که در آن از مولکول‌های منفرد پلیمری (معمولاً همیوگ^۱) برای اتصال به جای سیم‌های فلزی استفاده می‌شود. که ما در اینجا از رشته پلیمری پلی‌اسن^۲ استفاده کرده‌ایم. در حال حاضر مهمترین قطعات الکترونیکی که از مولکول‌ها ساخته شده، دیودها و ترانزیستورهای مولکولی هستند [۲]. یک پلیمر نوعی معمولاً بعنوان یک ماده عایق مورد توجه است. اما در دهه‌ی ۷۰ میلادی، شیراکاوا^۳، مک‌دیارمید^۴ و هیگر^۵ یک پلیمر رسانای الکتریکی هنگام سنتز پلی‌استیلن در فاز ترانس (*trans-PA*) کشف کردند [۳] و آزمایش نشان داد که نمونه ساخته شده شبیه فلز می‌باشد. همزمان با پیشرفت در زمینه الکترونیک مولکولی، شاخه دیگری از علوم هم در حال رشد سریع بود. با کشف مقاومت مغناطیسی غول آسا^۱ (*GMR*) در ۱۹۸۸، برای اولین بار انتقال اسپین-قطبیده^۶ از میان یک فلز غیرمغناطیسی نشان داده شد.

¹ Conjugated

² Polyacene

³ Hideki Shirakawa

⁴ Alan G. MacDiarmid

⁵ Alan J. Heeger

⁶ Giant Magnetoresistance

⁷ Spin-polarized

اثر *GMR* به طور مستقل توسط فرت^۸ [۴] و همکاران، گرونبرگ^۹ و همکاران کشف شد و تحقیق زیادی در زمینه دستگاههای اسپینترونیک^{۱۰} آغاز شد.

امروزه بسیاری از پژوهشگران تلاش می‌کنند ابزارهای «اسپینترونیک» را گسترش دهند که در آنها از اسپین الکترون نیز افزون بر بار الکتریکی آن برای ذخیره و پردازش اطلاعات استفاده می‌شود. در مواد آلی و پلیمرها به علت اینکه برهمکنش اسپین-مدار^{۱۱} و برهمکنش فوق ریز^{۱۲} آنها کوچک است [۵]، جهت اسپین الکترونهای انتقالی از میان آنها برای زمانی نسبتاً طولانی ثابت می‌ماند. ترابرد اسپین در پلیمرهای آلی پیامدی است که در تعدادی از آزمایشهای اخیر مطالعه شده است و مدرکی آشکار برای جریانهای اسپینی قطبیده^{۱۳} و مقاومت مغناطیسی عظیم می‌باشد. ما در این طرح به محاسبه ترابرد وابسته به اسپین از میان ترازهای انرژی مولکول *Polyacene*، قرارگرفته میان دو الکتروود فرومغناطیس با ساختار مکعبی ساده می‌پردازیم. *Polyacene* رشته‌های پلیمری هستند که از کنار هم قرار گرفتن دو زنجیره پلی‌استیلن در فاز ترانس^{۱۴} و اتصال عمودی بین آنها بوجود می‌آیند. (شکل ۱).

تحقیقات و پژوهش‌های انجام شده بیشتر روی الکترودهای یک بعدی صورت گرفته است ولی ما یک الکتروود سه بعدی که به واقعیت نزدیکتر است را در نظر می‌گیریم.

⁸ Fert

⁹ Grünberg

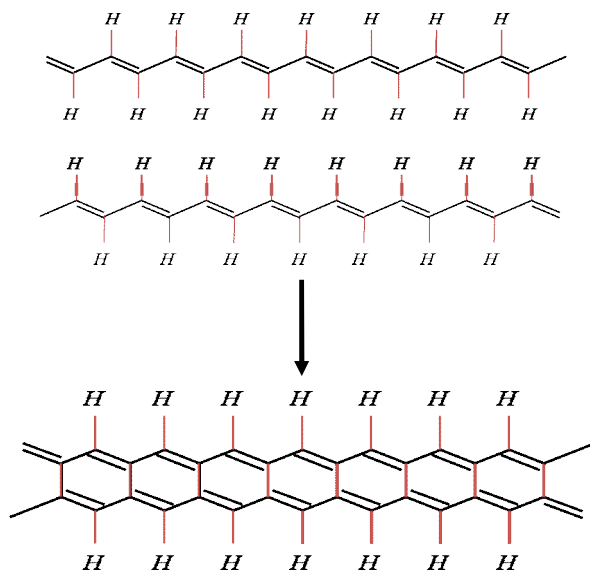
¹⁰ Spintronic

¹¹ Spin-orbit

¹² Hyperfine

¹³ Spin-polarized

¹⁴ *trans*-Polyacetylene



شکل ۱: اتصال دو زنجیره ترانس پلی استیلن از پهلو به یکدیگر و تشکیل رشته پلی اسن.

وسایل اسپیترونیک به علت استفاده از خاصیت اسپینی می توانند سریعتر و با انرژی کمتری مورد استفاده قرار بگیرند. همچنین با افزوده شدن اسپین به درجات آزادی الکترون ها می توان قطعاتی را طراحی کرد که تمیزدهنده الکترون های اسپین بالا و پایین از یکدیگر باشند. به این صورت در قطعات الکترونی و نیز مخابراتی می توان مانند سابق جریان الکتریکی داشت اما با این تفاوت که در این حالت می توان همزمان دو نوع اطلاعات را ارسال و دریافت کرد. این موضوع فصل جدیدی را در فناوری اطلاعات و حسگرهای تشخیص دهنده باز می کند.

می توان پایداری حالت های اسپینی را در قطعات مولکولی مختلف با استفاده از روش این پژوهش بررسی کرد، که می تواند تحولی عظیم در سامانه های مغناطیسی - الکترونیکی ایجاد کند. جهت اسپین الکترون های انتقالی از میان قطعات مولکولی برای زمانی نسبتاً طولانی ثابت می ماند که این نکته، وسایل اسپیترونیک را برای ذخیره اطلاعات و وسایل حسگر مغناطیسی و بطور بالقوه برای محاسبات کوانتومی مناسب می سازد.

ما در فصل اول درباره پلیمرهای رسانا صحبت خواهیم کرد و ساختار هامیلتونی مولکول پلی‌اسن را شرح می‌دهیم. در فصل دوم درباره اسپینترونیک مولکولی بحث می‌کنیم. در فصل سوم و چهارم فرمول-بندی و مدل سازی مورد استفاده را توضیح داده و در آخر، در فصل پنجم نتایج محاسبات خود را ارائه خواهیم کرد. در نهایت هدف از پژوهش حاضر، افزایش درک ما از ویژگی‌های اصلی رسانندگی اسپینترونیکی سامانه $FM/Polyacene/FM$ است و اینکه طول مولکول و قدرت پیوند الکتروود/ مولکول بر روی ویژگی‌های رسانندگی اسپینترونیکی این سامانه چه تاثیری دارد، و نیز بررسی اینکه چگونه می‌توان با اعمال ولتاژ گیت جریان اسپینی را کنترل نمود.

مراجع

- [1] M A Reed, J M Tour, *Scientific American* **282** 86-93 (2000).
- [2] C Joachim, J K Gimzewski and A Aviram, *Nature* **408** 541 (2000).
- [3] H Shirakawa, E J Louis, A G Macdiarmid, C K Chiang and A J Heeger, *J.Chem.Soc.*, 579 (1977).
- [4] M N Baibich, J M Broto, A Fert, F N V Dau, F Petroff, P Eitenne, G Creuzet, A Friederich and Chazelas *J. Phys. Rev. Lett.* **61** 2472 (1988).
- [5] Alireza Saffarzadeh, *cond-mat.mtrl-sci* 0605239v1 (2006).

پلیمرهای رسانا

و

ساختار پلی اسن

تا چند دهه قبل این گونه تصور می شد که پلاستیک‌ها برخلاف فلزات الکتریسیته را عبور نمی دهند و به عنوان جداره نارسانا در اطراف سیم‌های مسی حامل جریان در کابل‌های الکتریکی معمولی استفاده می شدند. ولی در سال ۱۹۷۴ در یک کشف مهم معلوم شد که پلاستیک هم می تواند با اصلاحات خاصی رسانای الکتریسیته شود. مک دیارمید^۱ از دانشگاه پنسیلوانیا و شیراکاوا^۲ از موسسه فناوری توکیو و آلن هیگر^۳ یک پلاستیک نارسانا را به رسانا تبدیل کرده بودند [۱] و به سبب این کشف به دریافت جایزه نوبل در رشته شیمی نیز نائل شدند. پلاستیک‌های رسانا به پیدایش الکترونیک پایه کربن منجر شد اما تلاش آنها برای ساختن ابررسانا از پلاستیک بی نتیجه ماند. ساخت و قالب ریزی پلاستیک‌ها آسان و نسبتاً ارزانتر است. بنابراین دستاورد این دانشمندان، به کاربردی شدن پلاستیکها در وسایلی، از جمله در قطعات کامپیوترهای آینده که در ساخت آنها از محاسبات مکانیک کوانتومی استفاده می شود، منجر خواهد شد.

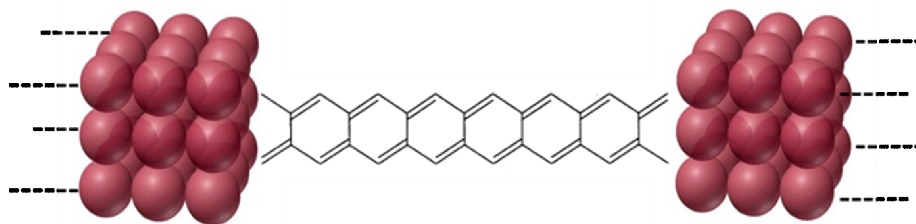
در این فصل ما به بحث پیرامون پلیمرهای رسانا می پردازیم، و به ویژه پلیمر ترانس پلی استیلن و پلی اسن را معرفی می کنیم. پس از آن هامیلتونین^۴ SSH را برای ترانس پلی استیلن معرفی می کنیم. در نهایت برای اینکه بتوانیم سامانه مورد نظر را که در فصل چهارم به صورت مفصل تشریح خواهیم کرد (شکل ۱-۱)، مطالعه کنیم، به تعریف هامیلتونی رشته‌های پلی استیلن و زنجیرهای پلی اسن خواهیم پرداخت.

¹ M. Diarmid

² Shirakawa

³ A. Heeger

⁴ W.P. Su , J.R. Schrieffer and A. Heeger



شکل ۱-۱: سامانه مولکول پلی اسن قرار گرفته میان دو الکتروود نیمه‌بینهایت ولتاژ- جریان.

۲-۱ پلیمر چیست؟

پیکره اصلی مواد آلی اتم‌های کربن است. هر اتم کربن ۴ الکترون ظرفیت دارد که می‌توانند پیوندهای یگانه، دوگانه و سه‌گانه با اتم‌های مجاور تشکیل دهند.

پلیمرها دسته‌ای از مواد آلی هستند که از تکرار یک مونومر به تعداد زیاد در یک زنجیر طولانی ایجاد می‌شوند. تعداد زیاد شکل‌های ممکن زنجیر مولکولی باعث شده تا بتوان پلیمرهایی ایجاد کرد که خواص جدید دارند، ولی ترکیب شیمیایی آنها تغییر نکرده است. مواد پلیمری معمولاً مجموعه‌هایی از رشته‌های پلیمری می‌باشند که در اشکال مختلف در زندگی روزمره با آنها (تحت عنوان مواد پلاستیکی) سروکار داریم.

۳-۱ چگونه پلیمرالکتریسته را عبور می‌دهد؟

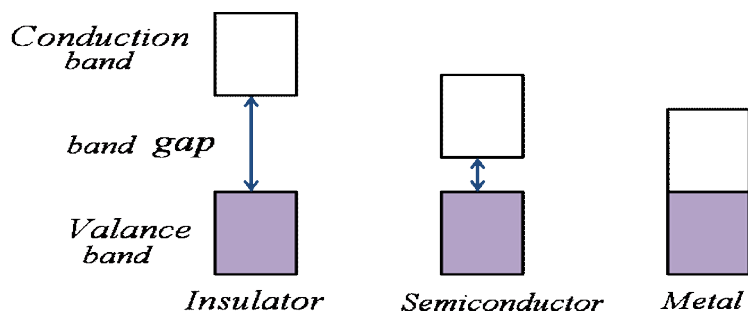
بیشتر پلیمرها و جامدات آلی که با آنها سروکار داریم نارسانا هستند که علت این پدیده وجود پیوندهای

یگانه (σ) بین دو کربن مجاور می‌باشد [۲]. الکترون‌ها در این نوع پیوند کاملاً جایگزیده بوده و احتمال حضور آنها در فضای بین دو اتم کربن بیشتر است. پلیمرهای اشباع شده (با پیوند فقط یگانه) نارسانا هستند. نوار ظرفیت کاملاً پر و گاف انرژی بین نوارهای ظرفیت و رسانش از ویژگی‌های این دسته از پلیمرها است. پلیمر برای این که قادر به رسانندگی جریان الکتریکی باشد، باید شامل پیوندهای یگانه و دوگانه یک درمیان بین اتم‌های کربن باشد. همچنین افزودن ناخالصی باعث ایجاد حفره و الکترون می‌شود و این حفره‌ها و الکترون‌های اضافی می‌توانند در طول مولکول حرکت کرده و الکتریسیته را عبور دهند، درست مثل فلزات که رسانایی بالای آنها مربوط به حرکت آزادانه الکترون‌ها در طول ساختارشان است. مواد آلی برای رسانا شدن نه تنها باید شامل حامل‌های بار باشند، بلکه باید سامانه اوربیتالی نیز داشته باشند که به حامل‌های بار اجازه حرکت دهد. ساختار همیوگ نیاز دوم را از طریق همپوشانی مداوم اوربیتال‌های π فراهم می‌کند. در پلیمرهای همیوگ، هیبرید-شدگی $sp^2 p_z$ معمولاً باعث وجود یک الکترون جفت نشده به ازای هر اتم کربن می‌شود و می‌توان از این دسته پلیمرها خواص نیمرسانایی و یا حتی فلزی انتظار داشت.

الکترون‌هایی که در پیوندهای π هستند نسبت به الکترون‌های σ به مراتب غیر جایگزیده‌تر بوده و می‌توانند به راحتی از یک اتم به اتم دیگر ترابرد شوند [۲،۳].

بسیاری از مواد آلی حامل‌های بار ذاتی ندارند. حامل‌های بار ممکن است در فرآیند اکسیداسیون (ناخالصی نوع p) مولکول‌های آلی بپذیرنده‌های الکترون مثل AsF_5, I_2 و یا در فرآیند احیا (ناخالصی نوع n) بادهنده الکترون مثل K, Na تولید شوند. البته ما در پژوهش خود با پلیمرهای خالص سروکار خواهیم داشت.

نظریه نواری کلاسیکی پیشنهاد می‌کند که نوار ظرفیت نیمه‌پر، از سیستم غیرجایگزیده- π تشکیل می‌شود که یک شرط ایده‌آل برای رسانندگی الکتریسیته است. یعنی جابجایی الکترونها پیوند- π می‌تواند باعث رسانش الکتریکی در طول زنجیر پلیمر گردد. در این نوع پلیمرها نوار ظرفیت نیمه‌پر است (مشابه یک فلز یک بعدی). اگرچه این ساختار غالباً ناپایدار بوده و با جابجایی کوچک اتم‌های کربن (جابجایی پیرلز) به حالت پایدار می‌رسد که منجر به ایجاد گاف انرژی و نیم‌رسانا شدن پلیمر می‌شود (شکل ۱-۲). در حقیقت پلیمر می‌تواند انرژی خود را با تناوب پیوند یگانه دوگانه پایین بیاورد و در نتیجه گاف انرژی ایجاد می‌شود.

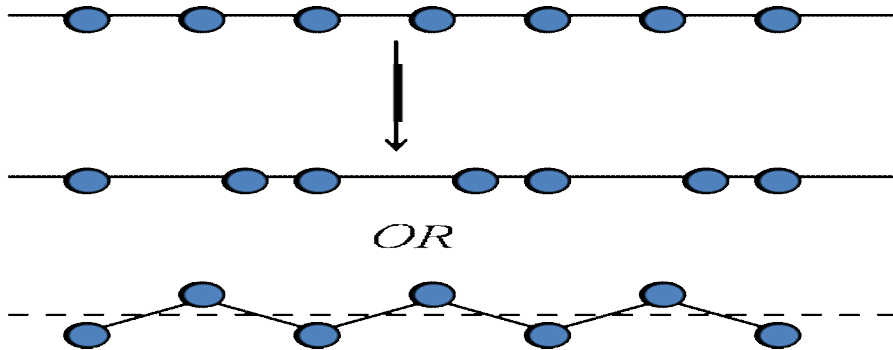


شکل ۱-۲: ساختار نواری الکتریکی مواد جامد [۲].

پلیمرهای همیوگ مختلف می‌توانند رسانندگی تا $1.7 \times 10^5 \text{ s/cm}$ داشته باشند که در مقایسه با رسانندگی مس یا نقره که 10^6 s/cm می‌باشد، رسانندگی بالایی است [۴].

۴-۱ ناپایداری پایریلز^۵ و پدیده دوپاری^۶

برطبق اثر پایریلز [۵]، یک سامانه شبه یک بعدی از نظر ساختاری به طور خودبخودی تمایل به ناپایداری دارد که به ناپایداری پایریلز معروف است (شکل ۳-۱). این ناپایداری منجر به زوج شدن جایگاه‌های متوالی در طول زنجیر می‌شود که دوپاری نامیده می‌شود. یک سامانه یک بعدی با نوار نیمه پر می‌تواند انرژی حالت پایه خود را بوسیله دوپاری سلول واحد دوگانه کاهش دهد. به عبارت دیگر، طول یکنواخت پیوند تبدیل به پیوندهای کوتاه و بلند می‌شود به طوری که میانگین آنها و بنابراین طول کل پیوند ثابت می‌ماند.



شکل ۳-۱: اثر ناپایداری پایریلز روی یک زنجیره شبه یک بعدی رسانای نوعی [۶].

دوپاری منجر به باز شدن یک گاف انرژی در سطح فرمی می‌شود که حاصل آن کاهش انرژی حالت‌های اشغال شده و در نتیجه پایداری ساختار است (شکل ۴-۱). کاهش انرژی الکترونی از یک طرف و افزایش انرژی

⁵ Peierls instability

⁶ Dimerization